

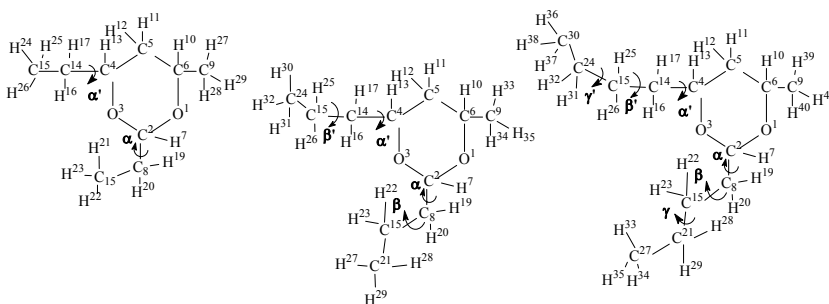
АВ ИНИТЮ РАСЧЕТ ГЕОМЕТРИЧЕСКОГО СТРОЕНИЯ 2,4,6-ТРИАЛКИЛ- 1,3-ДИОКСАНОВ

Гадзовский Д.И., Шепелевич И.С.

Башкирский государственный университет, Уфа

С использованием квантово-химических методов проведен конформационный анализ 2,6-диалкил-4-метил-1,3-диоксанов, образующихся в результате конденсации двух молекул альдегида с пропиленом по Принсу.

Расчеты проводились последовательно в приближениях RHF/3-21G(d',p), RHF/6-31G(d',p), B3LYP/6-31G(d',p). Методом RHF/3-21G(d',p) проводили предварительный конформационный анализ всех возможных конформаций. Геометрическое строение наиболее устойчивых конформеров уточняли методом B3LYP/6-31G(d',p).



Расчеты в приближении RHF/3-21G(d',p) показывают наибольшую устойчивость конформеров 2,6-дипропил-4-метил-1,3-диоксана, в которых углы α , α' , β и β' составляют $-57/-179^\circ$, 179° , -56° и 174° , тогда как для конформеров, рассчитанных методом B3LYP/6-31G(d',p), эти углы, равны -179° , -179° , -178° и 174° соответственно. Установлено, что 2,6-дипропил-4-метил-1,3-диоксан обладает большей конформационной подвижностью: четыре конформера одинаково устойчивы в пределах ошибки метода (B3LYP/6-31G(d',p)). Углы α , α' , β , β' , γ , γ' варьируются в широких пределах.